Mode d'emploi du logiciel chemsketch : Exemple avec la molécule de chlorométhane CH_3Cl

A partir du bureau, lancer le logiciel en cliquant sur l'icône 3D-Viewer et cliquer su OK

En bas de l'écran à gauche, choisir le menu 1-Chemsketch

Choisir l'atome de carbone C dans le menu à gauche et le placer dans la zone de dessin grâce à la souris ; une formule apparaît avec l'atome de carbone et des atomes d'hydrogène.

Dans le menu à gauche, choisir l'atome de chlore Cl à la souris et étirer à partir du carbone C pour créer la liaison C-Cl.

Dans le menu Tools, sélectionner 3D structure optimization

En bas de l'écran, à gauche, choisir le menu 2-Copy to 3D

On obtient alors :

Remarques :

- Si une molécule possède une liaison multiple entre deux atomes, il suffit de cliquer avant l'optimisation sur la liaison concernée.
- Dans le bandeau supérieur, on pourra trouver les outils nécessaires pour déterminer les caractéristiques de la molécule (longueur de liaison, angle …)

Pour enregistrer une molécule réalisée :